

Аннотация проекта Орлюк Ю.А.

«Квантовохимическое моделирование сборки тетразамещенного пиррола из бензонитрила и трех молекул фенилацетилен в суперосновной среде $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$ »

Пиррол является структурным элементом многих важных биологических, фармацевтических и промышленных соединений. Производные пиррола широко используются в медицине и входят в состав многих препаратов, обладающих противотуберкулезными, антибиотическими, противораковыми и другими ценными свойствами.

Недавно сотрудниками Иркутского института химии за одну препаративную стадию в мягких условиях (20°C , 15 мин) были синтезированы новые тетразамещенные арилпирролы в суперосновной среде $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$. Эта уникальная реакция позволяет получать пирролы с различными заместителями из легкодоступных ацетиленов и нитрилов. Однако механизм образования таких тетразамещенных пиррольных структур остается не ясен, поэтому актуально привлечение методов квантовой химии для теоретического моделирования происходящих взаимодействий. Кроме того, наличие нескольких реакционных центров в структуре молекул реагентов и интермедиатов делает возможным осуществление различных побочных химических процессов.

Целью проекта является проведение квантовохимического исследования механизма сборки 2-бензил-3,5-дифенил-4-фенилэтинил-1*H*-пиррола из бензонитрила и фенилацетилен в суперосновной среде $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$. В задачи данной работы входит определение кинетических и термодинамических характеристик отдельных стадий и установление наиболее вероятных маршрутов реакции. Полученные результаты помогут объяснить мягкие условия реакции и оценить возможность осуществления побочных процессов.